```
data_lach10

_publ_section_comment
;
One of the NEt4 cations (N3) is disordered, therefore the exact atom
positions can not be determined.
This results in errors in some of the bond angles and short
intermolecular interactions.
Due to the complex structure the structure was solved with the carbon
and oxygen atoms isotropic.
A H+ ion must be present in the structure to balance the charge, this
is most likely coordinating between the P=O
groups at the top of the anion, however it can not be seen due to the
quality of the data.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             ?
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C31 H74 N4 O43 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3119.47

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'Cc'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 'x, -y, z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 'x+1/2, -y+1/2, z+1/2'

_cell_length_a                    24.170
_cell_length_b                    10.764
_cell_length_c                    27.043
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  98.11
_cell_angle_gamma                 90.00
```

```
_cell_volume                        6965.3
_cell_formula_units_Z               4
_cell_measurement_temperature       200(2)
_cell_measurement_reflns_used       ?
_cell_measurement_theta_min         5.3
_cell_measurement_theta_max         89.7

_exptl_crystal_description          ?
_exptl_crystal_colour               Colourless
_exptl_crystal_size_max             ?
_exptl_crystal_size_mid             ?
_exptl_crystal_size_min             ?
_exptl_crystal_density_meas         ?
_exptl_crystal_density_diffrn       2.975
_exptl_crystal_density_method       'not measured'
_exptl_crystal_F_000                5664
_exptl_absorpt_coefficient_mu       31.030
_exptl_absorpt_correction_type      empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min     ?
_exptl_absorpt_correction_T_max     ?
_exptl_absorpt_process_details      'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature         200(2)
_diffrn_radiation_wavelength        0.67030
_diffrn_radiation_type              'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source            'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator     graphite
_diffrn_measurement_device_type     'Station 9.8'
_diffrn_measurement_method          'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean    ?
_diffrn_standards_number            ?
_diffrn_standards_interval_count    ?
_diffrn_standards_interval_time     ?
_diffrn_standards_decay_%           ?
_diffrn_reflns_number               31458
_diffrn_reflns_av_R_equivalents     0.0438
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI       0.0628
_diffrn_reflns_limit_h_min          -31
_diffrn_reflns_limit_h_max          31
_diffrn_reflns_limit_k_min          -13
_diffrn_reflns_limit_k_max          13
_diffrn_reflns_limit_l_min          -35
_diffrn_reflns_limit_l_max          35
_diffrn_reflns_theta_min            5.29
_diffrn_reflns_theta_max            89.65
_reflns_number_total                15511
_reflns_number_gt                   12905
_reflns_threshold_expression        >2sigma(I)

_computing_data_collection          ?
_computing_cell_refinement          ?
_computing_data_reduction           ?
_computing_structure_solution       'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement     'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics       'Ortep-3 for Windows (Farrugia,
1997)'
_computing_publication_material     'WinGX (Farrugia, 1999)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
```

```
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0144P)^2^+213.4198P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    0.51(2)
_refine_ls_number_reflns          15511
_refine_ls_number_parameters      443
_refine_ls_number_restraints      154
_refine_ls_R_factor_all           0.0515
_refine_ls_R_factor_gt            0.0383
_refine_ls_wR_factor_ref          0.0940
_refine_ls_wR_factor_gt           0.0872
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.019
_refine_ls_restrained_S_all       1.016
_refine_ls_shift/su_max           0.011
_refine_ls_shift/su_mean          0.001

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.8185(11) -0.139(2) 0.6372(10) 0.034(6) Uiso 1 1 d U . .
H1A H 0.7829 -0.1859 0.6308 0.040 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.8492 -0.2006 0.6385 0.040 Uiso 1 1 calc R . .
C1S C 0.5304(9) -0.578(2) 0.3418(8) 0.064(6) Uiso 1 1 d U . .
H1S1 H 0.5331 -0.6662 0.3501 0.097 Uiso 1 1 calc R . .
H1S2 H 0.4938 -0.5605 0.3223 0.097 Uiso 1 1 calc R . .
H1S3 H 0.5346 -0.5285 0.3726 0.097 Uiso 1 1 calc R . .
C2 C 0.8216(5) -0.0825(15) 0.6848(6) 0.009(3) Uiso 1 1 d DU . .
C2S C 0.6185(8) -0.6334(18) 0.3091(7) 0.049(4) Uiso 1 1 d U . .
H2S1 H 0.6089 -0.7103 0.3253 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
H2S2 H 0.6541 -0.6013 0.3262 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
```

H2S3 H 0.6220 -0.6503 0.2741 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.8459(9) -0.1463(19) 0.3619(8) 0.019(5) Uiso 1 1 d U . .
H3A H 0.8828 -0.1882 0.3669 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
H3B H 0.8167 -0.2107 0.3622 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
C3S C 0.5798(11) -0.440(2) 0.2879(10) 0.077(7) Uiso 1 1 d U . .
H3S H 0.5510 -0.3817 0.2905 0.093 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.8376(12) -0.077(3) 0.3093(13) 0.060(8) Uiso 1 1 d U . .
C5 C 0.5987(9) 0.015(2) 0.3976(9) 0.030(5) Uiso 1 1 d U . .
H5A H 0.5927 0.0365 0.4320 0.036 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.6287 0.0701 0.3890 0.036 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.5486(8) 0.0463(18) 0.3650(7) 0.030(5) Uiso 1 1 d U . .
H6A H 0.5415 0.1356 0.3673 0.045 Uiso 1 1 calc R . .
H6B H 0.5171 -0.0002 0.3750 0.045 Uiso 1 1 calc R . .
H6C H 0.5530 0.0249 0.3306 0.045 Uiso 1 1 calc R . .
C7 C 0.5770(4) -0.1968(9) 0.4207(4) 0.008(2) Uiso 1 1 d U . .
H7A H 0.5682 -0.1579 0.4518 0.010 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.5421 -0.1985 0.3967 0.010 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.5953(6) -0.3304(14) 0.4324(7) 0.018(3) Uiso 1 1 d U . .
H8A H 0.5649 -0.3757 0.4449 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.6284 -0.3307 0.4578 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H8C H 0.6042 -0.3705 0.4020 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.6311(4) -0.1643(10) 0.3509(4) 0.008(2) Uiso 1 1 d U . .
H9A H 0.5949 -0.1764 0.3292 0.010 Uiso 1 1 calc R . .
H9B H 0.6486 -0.2470 0.3570 0.010 Uiso 1 1 calc R . .
C10 C 0.6691(6) -0.0832(15) 0.3229(6) 0.021(3) Uiso 1 1 d U . .
H10A H 0.6740 -0.1233 0.2912 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.7056 -0.0735 0.3435 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
H10C H 0.6519 -0.0014 0.3162 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.6744(10) -0.116(2) 0.4368(8) 0.026(5) Uiso 1 1 d U . .
H11A H 0.7002 -0.0520 0.4266 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.6923 -0.1975 0.4341 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.6688(11) -0.093(2) 0.4938(8) 0.039(6) Uiso 1 1 d U . .
H12A H 0.7058 -0.0978 0.5138 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.6443 -0.1560 0.5050 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H12C H 0.6529 -0.0101 0.4976 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.7943(9) 0.397(2) 0.7168(8) 0.060(5) Uiso 1 1 d U . .
H13A H 0.8229 0.3329 0.7140 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.7792 0.4255 0.6827 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.7465(11) 0.342(2) 0.7428(10) 0.065(7) Uiso 1 1 d U . .
H14A H 0.7267 0.2781 0.7213 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.7203 0.4081 0.7486 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H14C H 0.7623 0.3049 0.7748 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.7816(8) 0.5976(18) 0.7622(7) 0.047(4) Uiso 1 1 d U . .
H15A H 0.8031 0.6690 0.7780 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.7607 0.5602 0.7874 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.7404(11) 0.644(2) 0.7186(9) 0.070(6) Uiso 1 1 d U . .
H16A H 0.7149 0.7041 0.7306 0.105 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.7188 0.5736 0.7029 0.105 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H 0.7607 0.6839 0.6940 0.105 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.8604(8) 0.5714(19) 0.7167(8) 0.060(5) Uiso 1 1 d DU . .
H17A H 0.8381 0.6123 0.6877 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.8841 0.5079 0.7035 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.8994(9) 0.671(2) 0.7457(8) 0.054(6) Uiso 1 1 d DU . .
H18A H 0.9187 0.7177 0.7221 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.9270 0.6296 0.7702 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H18C H 0.8769 0.7281 0.7629 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.8537(7) 0.4601(17) 0.7976(7) 0.050(4) Uiso 1 1 d DU . .
H19A H 0.8677 0.5329 0.8180 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.8285 0.4124 0.8163 0.060 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.9035(9) 0.378(2) 0.7884(9) 0.065(6) Uiso 1 1 d DU . .
H20A H 0.9244 0.3520 0.8205 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.9282 0.4245 0.7694 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.8896 0.3037 0.7693 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 1.0647(17) 1.029(5) 0.5985(18) 0.041(12) Uiso 0.56(2) 1 d PDU .
.
H21A H 1.0734 1.0685 0.5674 0.049 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .

H21B H 1.0345 1.0775 0.6106 0.049 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C21A C 1.1026(15) 0.910(4) 0.6134(14) 0.039(8) Uiso 0.44(2) 1 d PDU .
.
H21C H 1.1117 0.8565 0.6431 0.047 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H21D H 1.1052 0.9982 0.6245 0.047 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C22 C 1.1179(11) 1.029(3) 0.6389(11) 0.020(7) Uiso 0.56(2) 1 d PDU .
.
H22A H 1.1342 1.1129 0.6415 0.030 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H22B H 1.1454 0.9704 0.6292 0.030 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H22C H 1.1075 1.0049 0.6712 0.030 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C22A C 1.1436(15) 0.886(11) 0.576(3) 0.21(5) Uiso 0.44(2) 1 d PDU . .
H22D H 1.1818 0.9036 0.5916 0.322 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H22E H 1.1341 0.9398 0.5466 0.322 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H22F H 1.1408 0.7988 0.5653 0.322 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C23 C 1.0317(15) 0.744(2) 0.5846(15) 0.149(14) Uiso 1 1 d DU . .
H23A H 1.0363 0.7095 0.6188 0.179 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.9924 0.7311 0.5694 0.179 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 1.0700(13) 0.677(2) 0.5542(12) 0.070(10) Uiso 1 1 d DU . .
H24A H 1.1041 0.6520 0.5759 0.106 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H24B H 1.0797 0.7320 0.5279 0.106 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H24C H 1.0510 0.6029 0.5390 0.106 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C25 C 0.985(2) 0.888(5) 0.5592(16) 0.044(12) Uiso 0.56(2) 1 d PDU . .
H25A H 0.9615 0.9492 0.5746 0.052 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H25B H 0.9662 0.8062 0.5575 0.052 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C25A C 1.0429(12) 0.941(4) 0.5336(14) 0.044(9) Uiso 0.44(2) 1 d PDU .
.
H25C H 1.0516 1.0303 0.5361 0.052 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H25D H 1.0707 0.8992 0.5155 0.052 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C26 C 0.996(2) 0.932(4) 0.5072(14) 0.036(11) Uiso 0.56(2) 1 d PDU . .
H26A H 0.9611 0.9416 0.4849 0.053 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H26B H 1.0198 0.8705 0.4932 0.053 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
H26C H 1.0161 1.0121 0.5104 0.053 Uiso 0.56(2) 1 calc PR . .
C26A C 0.9839(13) 0.920(4) 0.5065(10) 0.016(9) Uiso 0.44(2) 1 d PDU .
.
H26D H 0.9816 0.9490 0.4720 0.025 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H26E H 0.9572 0.9662 0.5235 0.025 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
H26F H 0.9749 0.8311 0.5066 0.025 Uiso 0.44(2) 1 calc PR . .
C27 C 1.0007(18) 0.937(4) 0.6126(16) 0.154(14) Uiso 1 1 d U . .
H27A H 0.9641 0.9207 0.5923 0.185 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 1.0062 1.0285 0.6134 0.185 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.9979(14) 0.895(4) 0.6635(10) 0.102(13) Uiso 1 1 d DU . .
H28A H 0.9620 0.9199 0.6733 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 1.0284 0.9332 0.6863 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 1.0015 0.8047 0.6650 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.6202(6) -0.1125(13) 0.3987(5) 0.017(3) Uiso 1 1 d U . .
N1S N 0.5756(6) -0.5433(14) 0.3116(6) 0.047(4) Uiso 1 1 d U . .
N2 N 0.8204(5) 0.5057(16) 0.7471(6) 0.036(3) Uiso 1 1 d U . .
N3 N 1.0441(7) 0.8822(16) 0.5872(6) 0.040(5) Uiso 1 1 d DU . .
O1 O 0.9314(8) 0.1929(18) 0.6692(8) 0.028(4) Uiso 1 1 d U . .
O1S O 0.6153(8) -0.4072(18) 0.2628(7) 0.095(6) Uiso 1 1 d U . .
O2 O 0.8770(6) 0.0413(14) 0.5992(6) 0.016(3) Uiso 1 1 d U . .
O3 O 0.8218(7) 0.2189(16) 0.6383(8) 0.029(4) Uiso 1 1 d U . .
O4 O 0.7715(9) 0.0414(19) 0.5783(9) 0.043(5) Uiso 1 1 d U . .
O5 O 0.7047(8) 0.2023(19) 0.6290(9) 0.031(5) Uiso 1 1 d U . .
O6 O 0.7086(6) 0.2214(14) 0.5272(6) 0.019(4) Uiso 1 1 d U . .
O7 O 0.6171(7) 0.2881(16) 0.4527(7) 0.032(4) Uiso 1 1 d U . .
O8 O 0.7202(5) 0.2169(12) 0.4235(5) 0.010(3) Uiso 1 1 d U . .
O9 O 0.7321(8) 0.198(2) 0.3222(8) 0.035(5) Uiso 1 1 d U . .
O10 O 0.7904(8) 0.0399(18) 0.3982(8) 0.033(5) Uiso 1 1 d U . .
O11 O 0.8469(6) 0.2168(14) 0.3544(6) 0.017(3) Uiso 1 1 d U . .
O12 O 0.8962(6) 0.0443(12) 0.4150(6) 0.012(3) Uiso 1 1 d U . .
O13 O 0.9597(8) 0.1987(19) 0.3683(9) 0.030(5) Uiso 1 1 d U . .
O14 O 0.9549(7) 0.2227(16) 0.4721(7) 0.027(4) Uiso 1 1 d U . .
O15 O 1.0483(6) 0.2752(14) 0.5388(6) 0.021(4) Uiso 1 1 d U . .
O16 O 0.9452(9) 0.2212(19) 0.5684(9) 0.045(6) Uiso 1 1 d U . .
O17 O 0.8285(5) 0.2396(12) 0.5470(5) 0.010(3) Uiso 1 1 d U . .

```
O18 O 0.8400(7) 0.2310(15) 0.4472(7) 0.027(4) Uiso 1 1 d U . .
O19 O 0.8853(7) 0.3980(17) 0.5100(7) 0.036(4) Uiso 1 1 d U . .
O20 O 0.7745(5) 0.4013(12) 0.4868(5) 0.009(3) Uiso 1 1 d U . .
O21 O 0.8958(5) 0.3939(12) 0.6138(5) 0.024(3) Uiso 1 1 d U . .
O22 O 0.7608(5) 0.3983(11) 0.5889(5) 0.022(3) Uiso 1 1 d U . .
O23 O 0.6793(5) 0.4565(11) 0.5127(5) 0.011(3) Uiso 1 1 d U . .
O24 O 0.6897(10) 0.457(2) 0.4214(10) 0.039(6) Uiso 1 1 d U . .
O25 O 0.7790(5) 0.3958(11) 0.3804(4) 0.014(3) Uiso 1 1 d U . .
O26 O 0.9152(4) 0.3987(10) 0.4074(4) 0.013(2) Uiso 1 1 d U . .
O27 O 0.9814(8) 0.4584(17) 0.4764(8) 0.045(5) Uiso 1 1 d U . .
O28 O 0.9742(7) 0.4572(15) 0.5730(7) 0.016(4) Uiso 1 1 d U . .
O29 O 0.9286(6) 0.6463(14) 0.6191(6) 0.033(4) Uiso 1 1 d U . .
O30 O 0.8250(9) 0.565(2) 0.5622(9) 0.048(5) Uiso 1 1 d U . .
O31 O 0.7241(5) 0.6520(12) 0.5798(5) 0.018(3) Uiso 1 1 d U . .
O32 O 0.7451(6) 0.6287(16) 0.4803(7) 0.022(4) Uiso 1 1 d U . .
O33 O 0.7459(5) 0.6508(11) 0.3761(5) 0.017(3) Uiso 1 1 d U . .
O34 O 0.8374(5) 0.5638(12) 0.4347(5) 0.010(3) Uiso 1 1 d U . .
O35 O 0.9470(7) 0.6509(16) 0.4206(6) 0.035(4) Uiso 1 1 d U . .
O36 O 0.9147(7) 0.6280(17) 0.5145(7) 0.026(4) Uiso 1 1 d U . .
O37 O 0.8183(5) -0.1181(12) 0.5384(5) 0.027(3) Uiso 1 1 d U . .
O38 O 0.8725(5) -0.0399(13) 0.7047(5) 0.042(4) Uiso 1 1 d DU . .
H38 H 0.8710 -0.0124 0.7335 0.063 Uiso 1 1 calc R . .
O39 O 0.7804(6) -0.0605(14) 0.7037(5) 0.036(4) Uiso 1 1 d DU . .
O40 O 0.8328(6) -0.1281(13) 0.4536(5) 0.035(3) Uiso 1 1 d U . .
O41 O 0.8903(7) -0.0400(15) 0.2983(6) 0.048(5) Uiso 1 1 d U . .
O42 O 0.7972(6) -0.0718(13) 0.2841(5) 0.039(3) Uiso 1 1 d U . .
H42 H 0.8017 -0.0320 0.2582 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
Si1 Si 0.8321(4) 0.3135(2) 0.4969(5) 0.0185(5) Uiso 1 1 d U . .
P1 P 0.8224(3) -0.0367(5) 0.5843(2) 0.0239(15) Uani 1 1 d U . .
P2 P 0.8421(2) -0.0409(6) 0.4110(3) 0.0286(17) Uani 1 1 d U . .
W1 W 0.88995(4) 0.22126(9) 0.61537(4) 0.0145(3) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.75367(4) 0.22509(9) 0.58940(4) 0.0144(3) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.68519(4) 0.32222(10) 0.46818(4) 0.0158(3) Uani 1 1 d U . .
W4 W 0.77399(4) 0.22174(10) 0.37910(4) 0.0155(3) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.91013(4) 0.22518(9) 0.40516(4) 0.0146(3) Uani 1 1 d U . .
W6 W 0.97946(4) 0.32261(10) 0.52660(4) 0.0156(3) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.90405(4) 0.53984(9) 0.57371(5) 0.0158(3) Uani 1 1 d U . .
W8 W 0.74747(4) 0.54184(9) 0.54204(4) 0.0165(3) Uani 1 1 d U . .
W9 W 0.76051(4) 0.53916(9) 0.42087(4) 0.0168(3) Uani 1 1 d U . .
W10 W 0.91695(4) 0.54248(9) 0.45251(4) 0.0158(3) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
P1 0.049(4) 0.018(3) 0.004(3) 0.003(2) -0.002(2) 0.010(2)
P2 0.016(3) 0.029(3) 0.042(5) 0.002(3) 0.009(3) 0.0111(19)
W1 0.0178(5) 0.0132(5) 0.0113(7) 0.0026(4) -0.0020(5) 0.0064(3)
W2 0.0170(5) 0.0118(5) 0.0140(7) 0.0016(4) 0.0010(5) 0.0079(3)
W3 0.0157(5) 0.0172(5) 0.0136(7) 0.0005(4) -0.0007(4) 0.0114(3)
W4 0.0159(5) 0.0167(6) 0.0129(7) -0.0008(4) -0.0015(5) 0.0099(3)
W5 0.0150(5) 0.0161(6) 0.0127(7) 0.0000(4) 0.0017(5) 0.0093(3)
W6 0.0133(5) 0.0166(5) 0.0163(7) 0.0020(4) -0.0005(4) 0.0070(3)
W7 0.0186(5) 0.0136(6) 0.0150(7) -0.0009(4) 0.0014(5) 0.0055(3)
W8 0.0250(6) 0.0090(5) 0.0156(7) -0.0005(4) 0.0030(5) 0.0125(3)
W9 0.0246(6) 0.0123(6) 0.0133(7) 0.0041(4) 0.0021(5) 0.0144(3)
W10 0.0179(5) 0.0154(6) 0.0146(7) 0.0025(4) 0.0043(5) 0.0087(3)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
```

```
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.42(3) . ?
C1 P1 1.82(3) . ?
C1 H1A 0.9900 . ?
C1 H1B 0.9900 . ?
C1S N1S 1.50(3) . ?
C1S H1S1 0.9800 . ?
C1S H1S2 0.9800 . ?
C1S H1S3 0.9800 . ?
C2 O39 1.204(15) . ?
C2 O38 1.350(14) . ?
C2S N1S 1.43(2) . ?
C2S H2S1 0.9800 . ?
C2S H2S2 0.9800 . ?
C2S H2S3 0.9800 . ?
C3 C4 1.59(4) . ?
C3 P2 1.76(2) . ?
C3 H3A 0.9900 . ?
C3 H3B 0.9900 . ?
C3S O1S 1.22(3) . ?
C3S N1S 1.29(3) . ?
C3S H3S 0.9500 . ?
C4 O42 1.11(3) . ?
C4 O41 1.41(3) . ?
C5 C6 1.43(2) . ?
C5 N1 1.47(3) . ?
C5 H5A 0.9900 . ?
C5 H5B 0.9900 . ?
C6 H6A 0.9800 . ?
C6 H6B 0.9800 . ?
C6 H6C 0.9800 . ?
C7 C8 1.523(18) . ?
C7 N1 1.562(17) . ?
C7 H7A 0.9900 . ?
C7 H7B 0.9900 . ?
C8 H8A 0.9800 . ?
C8 H8B 0.9800 . ?
C8 H8C 0.9800 . ?
C9 N1 1.466(17) . ?
C9 C10 1.542(19) . ?
C9 H9A 0.9900 . ?
C9 H9B 0.9900 . ?
C10 H10A 0.9800 . ?
C10 H10B 0.9800 . ?
C10 H10C 0.9800 . ?
C11 N1 1.55(3) . ?
C11 C12 1.58(2) . ?
C11 H11A 0.9900 . ?
C11 H11B 0.9900 . ?
```

C12 H12A 0.9800 . ?
C12 H12B 0.9800 . ?
C12 H12C 0.9800 . ?
C13 N2 1.51(3) . ?
C13 C14 1.55(3) . ?
C13 H13A 0.9900 . ?
C13 H13B 0.9900 . ?
C14 H14A 0.9800 . ?
C14 H14B 0.9800 . ?
C14 H14C 0.9800 . ?
C15 N2 1.46(2) . ?
C15 C16 1.52(3) . ?
C15 H15A 0.9900 . ?
C15 H15B 0.9900 . ?
C16 H16A 0.9800 . ?
C16 H16B 0.9800 . ?
C16 H16C 0.9800 . ?
C17 N2 1.53(3) . ?
C17 C18 1.562(17) . ?
C17 H17A 0.9900 . ?
C17 H17B 0.9900 . ?
C18 H18A 0.9800 . ?
C18 H18B 0.9800 . ?
C18 H18C 0.9800 . ?
C19 C20 1.545(17) . ?
C19 N2 1.56(2) . ?
C19 H19A 0.9900 . ?
C19 H19B 0.9900 . ?
C20 H20A 0.9800 . ?
C20 H20B 0.9800 . ?
C20 H20C 0.9800 . ?
C21 C22 1.565(19) . ?
C21 N3 1.68(5) . ?
C21 H21A 0.9900 . ?
C21 H21B 0.9900 . ?
C21A N3 1.52(4) . ?
C21A C22A 1.54(2) . ?
C21A H21C 0.9900 . ?
C21A H21D 0.9900 . ?
C22 H22A 0.9800 . ?
C22 H22B 0.9800 . ?
C22 H22C 0.9800 . ?
C22A H22D 0.9800 . ?
C22A H22E 0.9800 . ?
C22A H22F 0.9800 . ?
C23 C24 1.506(18) . ?
C23 N3 1.514(18) . ?
C23 H23A 0.9900 . ?
C23 H23B 0.9900 . ?
C24 H24A 0.9800 . ?
C24 H24B 0.9800 . ?
C24 H24C 0.9800 . ?
C25 N3 1.53(5) . ?
C25 C26 1.549(19) . ?
C25 H25A 0.9900 . ?
C25 H25B 0.9900 . ?
C25A C26A 1.525(19) . ?
C25A N3 1.58(4) . ?
C25A H25C 0.9900 . ?
C25A H25D 0.9900 . ?
C26 H26A 0.9800 . ?
C26 H26B 0.9800 . ?
C26 H26C 0.9800 . ?
C26A H26D 0.9800 . ?
C26A H26E 0.9800 . ?
C26A H26F 0.9800 . ?

C27 N3 1.46(4) . ?
C27 C28 1.46(4) . ?
C27 H27A 0.9900 . ?
C27 H27B 0.9900 . ?
C28 H28A 0.9800 . ?
C28 H28B 0.9800 . ?
C28 H28C 0.9800 . ?
O1 W1 1.67(2) . ?
O2 P1 1.567(16) . ?
O2 W1 2.000(15) . ?
O3 W1 1.840(18) . ?
O3 W2 1.963(19) . ?
O4 P1 1.48(2) . ?
O4 W2 2.05(2) . ?
O5 W2 1.72(2) . ?
O6 W2 1.872(16) . ?
O6 W3 1.946(16) . ?
O7 W3 1.681(18) . ?
O8 W4 1.890(14) . ?
O8 W3 1.937(14) . ?
O9 W4 1.74(2) . ?
O10 P2 1.52(2) . ?
O10 W4 2.048(19) . ?
O11 W5 1.906(16) . ?
O11 W4 1.971(16) . ?
O12 P2 1.588(15) . ?
O12 W5 2.000(14) . ?
O13 W5 1.69(2) . ?
O14 W6 1.854(18) . ?
O14 W5 1.973(19) . ?
O15 W6 1.728(15) . ?
O16 W6 1.85(2) . ?
O16 W1 1.97(2) . ?
O17 Si1 1.584(18) . ?
O17 W1 2.211(14) . ?
O17 W2 2.279(14) . ?
O18 Si1 1.65(2) . ?
O18 W5 2.172(17) . ?
O18 W4 2.262(18) . ?
O19 Si1 1.575(19) . ?
O19 W7 2.299(19) . ?
O19 W6 2.397(17) . ?
O19 W10 2.399(19) . ?
O20 Si1 1.674(15) . ?
O20 W8 2.284(13) . ?
O20 W3 2.308(12) . ?
O20 W9 2.308(13) . ?
O21 W1 1.864(13) . ?
O21 W7 1.935(13) . ?
O22 W2 1.872(12) . ?
O22 W8 1.996(12) . ?
O23 W3 1.899(13) . ?
O23 W8 1.954(12) . ?
O24 W9 1.93(2) . ?
O24 W3 1.94(2) . ?
O25 W4 1.878(11) . ?
O25 W9 1.979(12) . ?
O26 W5 1.872(11) . ?
O26 W10 1.968(11) . ?
O27 W10 1.838(19) . ?
O27 W6 1.999(19) . ?
O28 W7 1.918(17) . ?
O28 W6 1.933(18) . ?
O29 W7 1.723(15) . ?
O30 W8 1.89(2) . ?
O30 W7 1.91(2) . ?

```
O31 W8 1.712(13) . ?
O32 W8 1.908(18) . ?
O32 W9 1.954(18) . ?
O33 W9 1.706(12) . ?
O34 W9 1.862(13) . ?
O34 W10 1.929(12) . ?
O35 W10 1.677(17) . ?
O36 W7 1.910(19) . ?
O36 W10 1.919(19) . ?
O37 P1 1.511(14) . ?
O38 H38 0.8400 . ?
O40 P2 1.528(16) . ?
O42 H42 0.8400 . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 116.8(17) . . ?
C2 C1 H1A 108.1 . . ?
P1 C1 H1A 108.1 . . ?
C2 C1 H1B 108.1 . . ?
P1 C1 H1B 108.1 . . ?
H1A C1 H1B 107.3 . . ?
N1S C1S H1S1 109.5 . . ?
N1S C1S H1S2 109.5 . . ?
H1S1 C1S H1S2 109.5 . . ?
N1S C1S H1S3 109.5 . . ?
H1S1 C1S H1S3 109.5 . . ?
H1S2 C1S H1S3 109.5 . . ?
O39 C2 O38 121.6(15) . . ?
O39 C2 C1 121.9(16) . . ?
O38 C2 C1 115.9(15) . . ?
N1S C2S H2S1 109.5 . . ?
N1S C2S H2S2 109.5 . . ?
H2S1 C2S H2S2 109.5 . . ?
N1S C2S H2S3 109.5 . . ?
H2S1 C2S H2S3 109.5 . . ?
H2S2 C2S H2S3 109.5 . . ?
C4 C3 P2 111.1(18) . . ?
C4 C3 H3A 109.4 . . ?
P2 C3 H3A 109.4 . . ?
C4 C3 H3B 109.4 . . ?
P2 C3 H3B 109.4 . . ?
H3A C3 H3B 108.0 . . ?
O1S C3S N1S 130(3) . . ?
O1S C3S H3S 115.2 . . ?
N1S C3S H3S 115.2 . . ?
O42 C4 O41 127(3) . . ?
O42 C4 C3 124(3) . . ?
O41 C4 C3 108(2) . . ?
C6 C5 N1 119.9(18) . . ?
C6 C5 H5A 107.3 . . ?
N1 C5 H5A 107.3 . . ?
C6 C5 H5B 107.3 . . ?
N1 C5 H5B 107.3 . . ?
H5A C5 H5B 106.9 . . ?
C5 C6 H6A 109.5 . . ?
C5 C6 H6B 109.5 . . ?
H6A C6 H6B 109.5 . . ?
C5 C6 H6C 109.5 . . ?
H6A C6 H6C 109.5 . . ?
```

```
H6B C6 H6C 109.5 . . ?
C8 C7 N1 116.0(10) . . ?
C8 C7 H7A 108.3 . . ?
N1 C7 H7A 108.3 . . ?
C8 C7 H7B 108.3 . . ?
N1 C7 H7B 108.3 . . ?
H7A C7 H7B 107.4 . . ?
C7 C8 H8A 109.5 . . ?
C7 C8 H8B 109.5 . . ?
H8A C8 H8B 109.5 . . ?
C7 C8 H8C 109.5 . . ?
H8A C8 H8C 109.5 . . ?
H8B C8 H8C 109.5 . . ?
N1 C9 C10 114.3(10) . . ?
N1 C9 H9A 108.7 . . ?
C10 C9 H9A 108.7 . . ?
N1 C9 H9B 108.7 . . ?
C10 C9 H9B 108.7 . . ?
H9A C9 H9B 107.6 . . ?
C9 C10 H10A 109.5 . . ?
C9 C10 H10B 109.5 . . ?
H10A C10 H10B 109.5 . . ?
C9 C10 H10C 109.5 . . ?
H10A C10 H10C 109.5 . . ?
H10B C10 H10C 109.5 . . ?
N1 C11 C12 117.6(17) . . ?
N1 C11 H11A 107.9 . . ?
C12 C11 H11A 107.9 . . ?
N1 C11 H11B 107.9 . . ?
C12 C11 H11B 107.9 . . ?
H11A C11 H11B 107.2 . . ?
C11 C12 H12A 109.5 . . ?
C11 C12 H12B 109.5 . . ?
H12A C12 H12B 109.5 . . ?
C11 C12 H12C 109.5 . . ?
H12A C12 H12C 109.5 . . ?
H12B C12 H12C 109.5 . . ?
N2 C13 C14 109.4(17) . . ?
N2 C13 H13A 109.8 . . ?
C14 C13 H13A 109.8 . . ?
N2 C13 H13B 109.8 . . ?
C14 C13 H13B 109.8 . . ?
H13A C13 H13B 108.2 . . ?
C13 C14 H14A 109.5 . . ?
C13 C14 H14B 109.5 . . ?
H14A C14 H14B 109.5 . . ?
C13 C14 H14C 109.5 . . ?
H14A C14 H14C 109.5 . . ?
H14B C14 H14C 109.5 . . ?
N2 C15 C16 112.5(17) . . ?
N2 C15 H15A 109.1 . . ?
C16 C15 H15A 109.1 . . ?
N2 C15 H15B 109.1 . . ?
C16 C15 H15B 109.1 . . ?
H15A C15 H15B 107.8 . . ?
C15 C16 H16A 109.5 . . ?
C15 C16 H16B 109.5 . . ?
H16A C16 H16B 109.5 . . ?
C15 C16 H16C 109.5 . . ?
H16A C16 H16C 109.5 . . ?
H16B C16 H16C 109.5 . . ?
N2 C17 C18 115.5(17) . . ?
N2 C17 H17A 108.4 . . ?
C18 C17 H17A 108.4 . . ?
N2 C17 H17B 108.4 . . ?
C18 C17 H17B 108.4 . . ?
```

```
H17A C17 H17B 107.5 . . ?
C17 C18 H18A 109.5 . . ?
C17 C18 H18B 109.5 . . ?
H18A C18 H18B 109.5 . . ?
C17 C18 H18C 109.5 . . ?
H18A C18 H18C 109.5 . . ?
H18B C18 H18C 109.5 . . ?
C20 C19 N2 110.9(15) . . ?
C20 C19 H19A 109.5 . . ?
N2 C19 H19A 109.5 . . ?
C20 C19 H19B 109.5 . . ?
N2 C19 H19B 109.5 . . ?
H19A C19 H19B 108.1 . . ?
C19 C20 H20A 109.5 . . ?
C19 C20 H20B 109.5 . . ?
H20A C20 H20B 109.5 . . ?
C19 C20 H20C 109.5 . . ?
H20A C20 H20C 109.5 . . ?
H20B C20 H20C 109.5 . . ?
C22 C21 N3 109(3) . . ?
C22 C21 H21A 109.9 . . ?
N3 C21 H21A 109.9 . . ?
C22 C21 H21B 110.0 . . ?
N3 C21 H21B 110.0 . . ?
H21A C21 H21B 108.3 . . ?
N3 C21A C22A 108(2) . . ?
N3 C21A H21C 110.2 . . ?
C22A C21A H21C 110.2 . . ?
N3 C21A H21D 110.2 . . ?
C22A C21A H21D 110.2 . . ?
H21C C21A H21D 108.5 . . ?
C21 C22 H22A 109.5 . . ?
C21 C22 H22B 109.5 . . ?
H22A C22 H22B 109.5 . . ?
C21 C22 H22C 109.5 . . ?
H22A C22 H22C 109.5 . . ?
H22B C22 H22C 109.5 . . ?
C21A C22A H22D 109.5 . . ?
C21A C22A H22E 109.5 . . ?
H22D C22A H22E 109.5 . . ?
C21A C22A H22F 109.5 . . ?
H22D C22A H22F 109.5 . . ?
H22E C22A H22F 109.5 . . ?
C24 C23 N3 111.4(17) . . ?
C24 C23 H23A 109.3 . . ?
N3 C23 H23A 109.3 . . ?
C24 C23 H23B 109.3 . . ?
N3 C23 H23B 109.3 . . ?
H23A C23 H23B 108.0 . . ?
C23 C24 H24A 109.5 . . ?
C23 C24 H24B 109.5 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.5 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
N3 C25 C26 101(3) . . ?
N3 C25 H25A 111.7 . . ?
C26 C25 H25A 111.7 . . ?
N3 C25 H25B 111.7 . . ?
C26 C25 H25B 111.7 . . ?
H25A C25 H25B 109.4 . . ?
C26A C25A N3 106(2) . . ?
C26A C25A H25C 110.5 . . ?
N3 C25A H25C 110.5 . . ?
C26A C25A H25D 110.5 . . ?
N3 C25A H25D 110.5 . . ?
```

```
H25C C25A H25D 108.7 . . ?
C25 C26 H26A 109.5 . . ?
C25 C26 H26B 109.5 . . ?
H26A C26 H26B 109.5 . . ?
C25 C26 H26C 109.5 . . ?
H26A C26 H26C 109.5 . . ?
H26B C26 H26C 109.5 . . ?
C25A C26A H26D 109.5 . . ?
C25A C26A H26E 109.5 . . ?
H26D C26A H26E 109.5 . . ?
C25A C26A H26F 109.5 . . ?
H26D C26A H26F 109.5 . . ?
H26E C26A H26F 109.5 . . ?
N3 C27 C28 117(3) . . ?
N3 C27 H27A 108.1 . . ?
C28 C27 H27A 108.1 . . ?
N3 C27 H27B 108.1 . . ?
C28 C27 H27B 108.1 . . ?
H27A C27 H27B 107.3 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.5 . . ?
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.5 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
C5 N1 C9 116.4(15) . . ?
C5 N1 C11 107.3(14) . . ?
C9 N1 C11 109.8(12) . . ?
C5 N1 C7 107.4(14) . . ?
C9 N1 C7 109.1(10) . . ?
C11 N1 C7 106.4(13) . . ?
C3S N1S C2S 116.7(18) . . ?
C3S N1S C1S 126.6(19) . . ?
C2S N1S C1S 116.7(16) . . ?
C15 N2 C13 116.0(14) . . ?
C15 N2 C17 108.5(15) . . ?
C13 N2 C17 108.4(15) . . ?
C15 N2 C19 103.8(14) . . ?
C13 N2 C19 110.8(15) . . ?
C17 N2 C19 109.2(13) . . ?
C27 N3 C23 106(2) . . ?
C27 N3 C21A 112(2) . . ?
C23 N3 C21A 113(2) . . ?
C27 N3 C25 62(3) . . ?
C23 N3 C25 82(3) . . ?
C21A N3 C25 166(3) . . ?
C27 N3 C25A 110(2) . . ?
C23 N3 C25A 112(2) . . ?
C21A N3 C25A 104(2) . . ?
C25 N3 C25A 68.5(19) . . ?
C27 N3 C21 75(3) . . ?
C23 N3 C21 171(2) . . ?
C21A N3 C21 60(2) . . ?
C25 N3 C21 106(3) . . ?
C25A N3 C21 76(2) . . ?
P1 O2 W1 132.5(9) . . ?
W1 O3 W2 118.5(10) . . ?
P1 O4 W2 136.0(13) . . ?
W2 O6 W3 142.2(8) . . ?
W4 O8 W3 141.3(7) . . ?
P2 O10 W4 136.6(12) . . ?
W5 O11 W4 114.8(8) . . ?
P2 O12 W5 134.8(9) . . ?
W6 O14 W5 142.6(10) . . ?
W6 O16 W1 142.8(12) . . ?
Si1 O17 W1 130.4(8) . . ?
```

```
Si1 O17 W2 127.4(8) . . ?
W1 O17 W2 93.5(5) . . ?
Si1 O18 W5 129.3(10) . . ?
Si1 O18 W4 122.7(9) . . ?
W5 O18 W4 94.9(7) . . ?
Si1 O19 W7 128.3(11) . . ?
Si1 O19 W6 124.8(10) . . ?
W7 O19 W6 90.2(6) . . ?
Si1 O19 W10 123.6(11) . . ?
W7 O19 W10 90.5(6) . . ?
W6 O19 W10 87.7(6) . . ?
Si1 O20 W8 125.1(8) . . ?
Si1 O20 W3 123.9(7) . . ?
W8 O20 W3 92.5(4) . . ?
Si1 O20 W9 121.1(8) . . ?
W8 O20 W9 93.2(5) . . ?
W3 O20 W9 92.2(4) . . ?
W1 O21 W7 146.7(8) . . ?
W2 O22 W8 140.3(7) . . ?
W3 O23 W8 118.7(6) . . ?
W9 O24 W3 118.7(12) . . ?
W4 O25 W9 140.3(6) . . ?
W5 O26 W10 143.1(6) . . ?
W10 O27 W6 120.0(10) . . ?
W7 O28 W6 119.5(9) . . ?
W8 O30 W7 162.6(13) . . ?
W8 O32 W9 119.5(9) . . ?
W9 O34 W10 164.7(8) . . ?
W7 O36 W10 121.2(9) . . ?
C2 O38 H38 109.5 . . ?
C4 O42 H42 109.5 . . ?
O19 Si1 O17 103.9(11) . . ?
O19 Si1 O18 108.0(11) . . ?
O17 Si1 O18 117.1(4) . . ?
O19 Si1 O20 110.2(4) . . ?
O17 Si1 O20 106.2(9) . . ?
O18 Si1 O20 111.2(10) . . ?
O4 P1 O37 106.4(11) . . ?
O4 P1 O2 112.3(11) . . ?
O37 P1 O2 118.6(9) . . ?
O4 P1 C1 107.1(13) . . ?
O37 P1 C1 106.8(10) . . ?
O2 P1 C1 104.9(11) . . ?
O10 P2 O40 108.6(10) . . ?
O10 P2 O12 109.1(10) . . ?
O40 P2 O12 120.7(9) . . ?
O10 P2 C3 109.0(11) . . ?
O40 P2 C3 101.7(10) . . ?
O12 P2 C3 107.1(10) . . ?
O1 W1 O3 99.0(9) . . ?
O1 W1 O21 99.4(8) . . ?
O3 W1 O21 95.5(7) . . ?
O1 W1 O16 100.6(9) . . ?
O3 W1 O16 159.8(9) . . ?
O21 W1 O16 85.7(7) . . ?
O1 W1 O2 94.0(8) . . ?
O3 W1 O2 86.6(7) . . ?
O21 W1 O2 165.9(6) . . ?
O16 W1 O2 87.6(8) . . ?
O1 W1 O17 172.8(7) . . ?
O3 W1 O17 75.9(7) . . ?
O21 W1 O17 86.3(5) . . ?
O16 W1 O17 84.1(8) . . ?
O2 W1 O17 80.7(6) . . ?
O5 W2 O6 101.1(9) . . ?
O5 W2 O22 102.6(8) . . ?
```

```
O6 W2 O22 93.3(6) . . ?
O5 W2 O3 99.2(9) . . ?
O6 W2 O3 158.7(8) . . ?
O22 W2 O3 88.3(6) . . ?
O5 W2 O4 97.5(9) . . ?
O6 W2 O4 87.5(8) . . ?
O22 W2 O4 159.4(7) . . ?
O3 W2 O4 83.8(8) . . ?
O5 W2 O17 170.5(8) . . ?
O6 W2 O17 87.2(6) . . ?
O22 W2 O17 81.3(5) . . ?
O3 W2 O17 72.0(7) . . ?
O4 W2 O17 78.2(7) . . ?
O7 W3 O23 99.5(7) . . ?
O7 W3 O8 102.5(7) . . ?
O23 W3 O8 156.8(5) . . ?
O7 W3 O24 98.3(9) . . ?
O23 W3 O24 82.0(8) . . ?
O8 W3 O24 87.7(8) . . ?
O7 W3 O6 104.1(8) . . ?
O23 W3 O6 86.8(6) . . ?
O8 W3 O6 94.7(6) . . ?
O24 W3 O6 156.3(8) . . ?
O7 W3 O20 170.9(7) . . ?
O23 W3 O20 74.5(5) . . ?
O8 W3 O20 82.8(5) . . ?
O24 W3 O20 74.3(8) . . ?
O6 W3 O20 82.6(6) . . ?
O9 W4 O25 101.2(8) . . ?
O9 W4 O8 101.0(8) . . ?
O25 W4 O8 93.6(5) . . ?
O9 W4 O11 97.7(9) . . ?
O25 W4 O11 88.6(6) . . ?
O8 W4 O11 160.3(6) . . ?
O9 W4 O10 98.5(9) . . ?
O25 W4 O10 159.9(7) . . ?
O8 W4 O10 86.5(7) . . ?
O11 W4 O10 84.8(7) . . ?
O9 W4 O18 169.5(8) . . ?
O25 W4 O18 84.5(5) . . ?
O8 W4 O18 87.3(6) . . ?
O11 W4 O18 73.4(7) . . ?
O10 W4 O18 75.4(7) . . ?
O13 W5 O26 98.0(8) . . ?
O13 W5 O11 97.5(9) . . ?
O26 W5 O11 96.4(6) . . ?
O13 W5 O14 101.3(9) . . ?
O26 W5 O14 87.7(6) . . ?
O11 W5 O14 159.9(7) . . ?
O13 W5 O12 93.5(8) . . ?
O26 W5 O12 168.0(6) . . ?
O11 W5 O12 85.3(6) . . ?
O14 W5 O12 86.9(7) . . ?
O13 W5 O18 170.5(8) . . ?
O26 W5 O18 90.4(5) . . ?
O11 W5 O18 76.8(7) . . ?
O14 W5 O18 83.5(7) . . ?
O12 W5 O18 78.5(6) . . ?
O15 W6 O16 102.2(8) . . ?
O15 W6 O14 100.0(7) . . ?
O16 W6 O14 91.3(9) . . ?
O15 W6 O28 104.3(7) . . ?
O16 W6 O28 88.3(9) . . ?
O14 W6 O28 155.3(7) . . ?
O15 W6 O27 103.4(8) . . ?
O16 W6 O27 154.4(9) . . ?
```

```
O14 W6 O27 85.4(8) . . ?
O28 W6 O27 84.4(8) . . ?
O15 W6 O19 177.4(7) . . ?
O16 W6 O19 79.6(8) . . ?
O14 W6 O19 81.8(7) . . ?
O28 W6 O19 73.8(7) . . ?
O27 W6 O19 74.8(7) . . ?
O29 W7 O36 101.2(8) . . ?
O29 W7 O30 104.9(8) . . ?
O36 W7 O30 92.4(9) . . ?
O29 W7 O28 95.7(7) . . ?
O36 W7 O28 89.9(8) . . ?
O30 W7 O28 158.4(8) . . ?
O29 W7 O21 101.1(7) . . ?
O36 W7 O21 155.5(7) . . ?
O30 W7 O21 91.6(8) . . ?
O28 W7 O21 77.9(6) . . ?
O29 W7 O19 171.0(6) . . ?
O36 W7 O19 74.7(7) . . ?
O30 W7 O19 83.5(8) . . ?
O28 W7 O19 76.4(7) . . ?
O21 W7 O19 81.7(6) . . ?
O31 W8 O30 97.6(8) . . ?
O31 W8 O32 102.2(7) . . ?
O30 W8 O32 95.3(9) . . ?
O31 W8 O23 103.8(6) . . ?
O30 W8 O23 157.3(8) . . ?
O32 W8 O23 87.5(6) . . ?
O31 W8 O22 101.2(6) . . ?
O30 W8 O22 81.7(8) . . ?
O32 W8 O22 156.6(6) . . ?
O23 W8 O22 86.8(5) . . ?
O31 W8 O20 175.8(5) . . ?
O30 W8 O20 85.0(8) . . ?
O32 W8 O20 74.3(6) . . ?
O23 W8 O20 74.1(5) . . ?
O22 W8 O20 82.4(5) . . ?
O33 W9 O34 98.2(6) . . ?
O33 W9 O24 103.5(8) . . ?
O34 W9 O24 157.7(8) . . ?
O33 W9 O32 101.0(7) . . ?
O34 W9 O32 93.7(6) . . ?
O24 W9 O32 87.0(9) . . ?
O33 W9 O25 101.4(5) . . ?
O34 W9 O25 85.8(5) . . ?
O24 W9 O25 85.2(8) . . ?
O32 W9 O25 157.5(6) . . ?
O33 W9 O20 173.5(5) . . ?
O34 W9 O20 84.5(5) . . ?
O24 W9 O20 74.5(8) . . ?
O32 W9 O20 72.9(6) . . ?
O25 W9 O20 84.6(5) . . ?
O35 W10 O27 96.7(8) . . ?
O35 W10 O36 100.6(8) . . ?
O27 W10 O36 93.2(8) . . ?
O35 W10 O34 106.1(7) . . ?
O27 W10 O34 155.7(7) . . ?
O36 W10 O34 90.6(7) . . ?
O35 W10 O26 101.6(7) . . ?
O27 W10 O26 76.9(7) . . ?
O36 W10 O26 156.6(6) . . ?
O34 W10 O26 90.3(5) . . ?
O35 W10 O19 170.3(7) . . ?
O27 W10 O19 77.5(8) . . ?
O36 W10 O19 72.2(7) . . ?
O34 W10 O19 80.9(6) . . ?
```

```
O26 W10 O19 84.9(6) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
P1 C1 C2 O39 99(2) . . . . ?
P1 C1 C2 O38 -73(2) . . . . ?
P2 C3 C4 O42 -97(3) . . . . ?
P2 C3 C4 O41 90(2) . . . . ?
C6 C5 N1 C9 56(3) . . . . ?
C6 C5 N1 C11 180(2) . . . . ?
C6 C5 N1 C7 -66(3) . . . . ?
C10 C9 N1 C5 53.1(17) . . . . ?
C10 C9 N1 C11 -68.9(16) . . . . ?
C10 C9 N1 C7 174.8(10) . . . . ?
C12 C11 N1 C5 66(2) . . . . ?
C12 C11 N1 C9 -166.4(16) . . . . ?
C12 C11 N1 C7 -48(2) . . . . ?
C8 C7 N1 C5 -171.3(14) . . . . ?
C8 C7 N1 C9 61.8(14) . . . . ?
C8 C7 N1 C11 -56.6(16) . . . . ?
O1S C3S N1S C2S 1(4) . . . . ?
O1S C3S N1S C1S -180(2) . . . . ?
C16 C15 N2 C13 -52(2) . . . . ?
C16 C15 N2 C17 70(2) . . . . ?
C16 C15 N2 C19 -173.6(17) . . . . ?
C14 C13 N2 C15 -49(2) . . . . ?
C14 C13 N2 C17 -170.8(17) . . . . ?
C14 C13 N2 C19 69(2) . . . . ?
C18 C17 N2 C15 64(2) . . . . ?
C18 C17 N2 C13 -169.3(17) . . . . ?
C18 C17 N2 C19 -49(2) . . . . ?
C20 C19 N2 C15 -170.8(16) . . . . ?
C20 C19 N2 C13 64(2) . . . . ?
C20 C19 N2 C17 -55(2) . . . . ?
C28 C27 N3 C23 61(4) . . . . ?
C28 C27 N3 C21A -62(4) . . . . ?
C28 C27 N3 C25 132(5) . . . . ?
C28 C27 N3 C25A -178(3) . . . . ?
C28 C27 N3 C21 -110(4) . . . . ?
C24 C23 N3 C27 174(3) . . . . ?
C24 C23 N3 C21A -63(4) . . . . ?
C24 C23 N3 C25 116(3) . . . . ?
C24 C23 N3 C25A 54(4) . . . . ?
C24 C23 N3 C21 -92(16) . . . . ?
C22A C21A N3 C27 -162(5) . . . . ?
C22A C21A N3 C23 79(6) . . . . ?
C22A C21A N3 C25 -99(11) . . . . ?
C22A C21A N3 C25A -42(6) . . . . ?
C22A C21A N3 C21 -106(6) . . . . ?
C26 C25 N3 C27 136(4) . . . . ?
C26 C25 N3 C23 -111(3) . . . . ?
C26 C25 N3 C21A 67(11) . . . . ?
C26 C25 N3 C25A 7(3) . . . . ?
C26 C25 N3 C21 74(4) . . . . ?
C26A C25A N3 C27 -56(4) . . . . ?
C26A C25A N3 C23 61(3) . . . . ?
C26A C25A N3 C21A -177(3) . . . . ?
```

```
C26A C25A N3 C25 -10(3) . . . . ?
C26A C25A N3 C21 -124(3) . . . . ?
C22 C21 N3 C27 111(4) . . . . ?
C22 C21 N3 C23 14(18) . . . . ?
C22 C21 N3 C21A -17(3) . . . . ?
C22 C21 N3 C25 165(3) . . . . ?
C22 C21 N3 C25A -133(4) . . . . ?
W7 O19 Si1 O17 -55.9(14) . . . . ?
W6 O19 Si1 O17 67.7(14) . . . . ?
W10 O19 Si1 O17 -178.4(10) . . . . ?
W7 O19 Si1 O18 179.2(11) . . . . ?
W6 O19 Si1 O18 -57.2(15) . . . . ?
W10 O19 Si1 O18 56.6(13) . . . . ?
W7 O19 Si1 O20 57.5(18) . . . . ?
W6 O19 Si1 O20 -178.9(6) . . . . ?
W10 O19 Si1 O20 -65.1(17) . . . . ?
W1 O17 Si1 O19 -11.9(14) . . . . ?
W2 O17 Si1 O19 126.9(10) . . . . ?
W1 O17 Si1 O18 107.0(11) . . . . ?
W2 O17 Si1 O18 -114.2(11) . . . . ?
W1 O17 Si1 O20 -128.2(10) . . . . ?
W2 O17 Si1 O20 10.6(12) . . . . ?
W5 O18 Si1 O19 2.2(16) . . . . ?
W4 O18 Si1 O19 -128.8(11) . . . . ?
W5 O18 Si1 O17 -114.5(12) . . . . ?
W4 O18 Si1 O17 114.5(11) . . . . ?
W5 O18 Si1 O20 123.2(11) . . . . ?
W4 O18 Si1 O20 -7.7(14) . . . . ?
W8 O20 Si1 O19 -56.1(16) . . . . ?
W3 O20 Si1 O19 -178.5(6) . . . . ?
W9 O20 Si1 O19 64.1(16) . . . . ?
W8 O20 Si1 O17 55.8(10) . . . . ?
W3 O20 Si1 O17 -66.6(11) . . . . ?
W9 O20 Si1 O17 176.0(8) . . . . ?
W8 O20 Si1 O18 -175.9(9) . . . . ?
W3 O20 Si1 O18 61.7(12) . . . . ?
W9 O20 Si1 O18 -55.7(11) . . . . ?
W2 O4 P1 O37 -136.5(18) . . . . ?
W2 O4 P1 O2 -5(2) . . . . ?
W2 O4 P1 C1 110(2) . . . . ?
W1 O2 P1 O4 4.2(19) . . . . ?
W1 O2 P1 O37 129.0(12) . . . . ?
W1 O2 P1 C1 -111.9(15) . . . . ?
C2 C1 P1 O4 -66(2) . . . . ?
C2 C1 P1 O37 179.9(16) . . . . ?
C2 C1 P1 O2 53(2) . . . . ?
W4 O10 P2 O40 140.3(17) . . . . ?
W4 O10 P2 O12 7(2) . . . . ?
W4 O10 P2 C3 -109.7(19) . . . . ?
W5 O12 P2 O10 -2.3(18) . . . . ?
W5 O12 P2 O40 -129.1(12) . . . . ?
W5 O12 P2 C3 115.6(14) . . . . ?
C4 C3 P2 O10 48.6(19) . . . . ?
C4 C3 P2 O40 163.1(16) . . . . ?
C4 C3 P2 O12 -69.4(17) . . . . ?
W2 O3 W1 O1 -171.9(10) . . . . ?
W2 O3 W1 O21 87.7(10) . . . . ?
W2 O3 W1 O16 -5(3) . . . . ?
W2 O3 W1 O2 -78.4(10) . . . . ?
W2 O3 W1 O17 2.8(8) . . . . ?
W7 O21 W1 O1 138.0(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O3 -121.9(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O16 37.9(14) . . . . ?
W7 O21 W1 O2 -24(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O17 -46.4(13) . . . . ?
W6 O16 W1 O1 -113(2) . . . . ?
```

```
W6 O16 W1 O3 80(3) . . . . ?
W6 O16 W1 O21 -14(2) . . . . ?
W6 O16 W1 O2 154(2) . . . . ?
W6 O16 W1 O17 73(2) . . . . ?
P1 O2 W1 O1 128.4(15) . . . . ?
P1 O2 W1 O3 29.6(15) . . . . ?
P1 O2 W1 O21 -69(3) . . . . ?
P1 O2 W1 O16 -131.1(15) . . . . ?
P1 O2 W1 O17 -46.6(13) . . . . ?
Si1 O17 W1 O1 -168(6) . . . . ?
W2 O17 W1 O1 44(6) . . . . ?
Si1 O17 W1 O3 146.2(12) . . . . ?
W2 O17 W1 O3 -2.2(6) . . . . ?
Si1 O17 W1 O21 49.6(10) . . . . ?
W2 O17 W1 O21 -98.8(5) . . . . ?
Si1 O17 W1 O16 -36.4(11) . . . . ?
W2 O17 W1 O16 175.2(7) . . . . ?
Si1 O17 W1 O2 -125.0(11) . . . . ?
W2 O17 W1 O2 86.6(6) . . . . ?
W3 O6 W2 O5 118.9(15) . . . . ?
W3 O6 W2 O22 15.4(15) . . . . ?
W3 O6 W2 O3 -78(2) . . . . ?
W3 O6 W2 O4 -143.9(15) . . . . ?
W3 O6 W2 O17 -65.6(14) . . . . ?
W8 O22 W2 O5 -116.1(12) . . . . ?
W8 O22 W2 O6 -13.9(11) . . . . ?
W8 O22 W2 O3 144.8(11) . . . . ?
W8 O22 W2 O4 78(2) . . . . ?
W8 O22 W2 O17 72.7(10) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 173.3(11) . . . . ?
W1 O3 W2 O6 10(3) . . . . ?
W1 O3 W2 O22 -84.2(10) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 76.7(11) . . . . ?
W1 O3 W2 O17 -2.8(8) . . . . ?
P1 O4 W2 O5 -125(2) . . . . ?
P1 O4 W2 O6 134(2) . . . . ?
P1 O4 W2 O22 42(4) . . . . ?
P1 O4 W2 O3 -26(2) . . . . ?
P1 O4 W2 O17 46.8(19) . . . . ?
Si1 O17 W2 O5 -171(4) . . . . ?
W1 O17 W2 O5 -22(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O6 37.0(10) . . . . ?
W1 O17 W2 O6 -173.2(6) . . . . ?
Si1 O17 W2 O22 -56.8(10) . . . . ?
W1 O17 W2 O22 93.1(5) . . . . ?
Si1 O17 W2 O3 -147.8(11) . . . . ?
W1 O17 W2 O3 2.1(6) . . . . ?
Si1 O17 W2 O4 124.9(12) . . . . ?
W1 O17 W2 O4 -85.2(7) . . . . ?
W8 O23 W3 O7 -177.7(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O8 -16.0(18) . . . . ?
W8 O23 W3 O24 -80.6(9) . . . . ?
W8 O23 W3 O6 78.5(8) . . . . ?
W8 O23 W3 O20 -4.7(6) . . . . ?
W4 O8 W3 O7 133.0(13) . . . . ?
W4 O8 W3 O23 -29(2) . . . . ?
W4 O8 W3 O24 35.0(13) . . . . ?
W4 O8 W3 O6 -121.4(12) . . . . ?
W4 O8 W3 O20 -39.5(12) . . . . ?
W9 O24 W3 O7 179.8(13) . . . . ?
W9 O24 W3 O23 81.3(13) . . . . ?
W9 O24 W3 O8 -77.9(13) . . . . ?
W9 O24 W3 O6 19(3) . . . . ?
W9 O24 W3 O20 5.2(11) . . . . ?
W2 O6 W3 O7 -140.9(14) . . . . ?
W2 O6 W3 O23 -41.8(14) . . . . ?
```

```
W2 O6 W3 O8 115.0(14) . . . . ?
W2 O6 W3 O24 20(3) . . . . ?
W2 O6 W3 O20 32.9(14) . . . . ?
Si1 O20 W3 O7 -171(4) . . . . ?
W8 O20 W3 O7 53(5) . . . . ?
W9 O20 W3 O7 -40(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O23 139.8(11) . . . . ?
W8 O20 W3 O23 3.6(5) . . . . ?
W9 O20 W3 O23 -89.7(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O8 -44.6(10) . . . . ?
W8 O20 W3 O8 179.1(6) . . . . ?
W9 O20 W3 O8 85.8(5) . . . . ?
Si1 O20 W3 O24 -134.3(13) . . . . ?
W8 O20 W3 O24 89.4(8) . . . . ?
W9 O20 W3 O24 -3.8(8) . . . . ?
Si1 O20 W3 O6 51.1(10) . . . . ?
W8 O20 W3 O6 -85.1(6) . . . . ?
W9 O20 W3 O6 -178.4(6) . . . . ?
W9 O25 W4 O9 119.5(11) . . . . ?
W9 O25 W4 O8 17.5(10) . . . . ?
W9 O25 W4 O11 -142.9(10) . . . . ?
W9 O25 W4 O10 -72(2) . . . . ?
W9 O25 W4 O18 -69.4(10) . . . . ?
W3 O8 W4 O9 -112.9(13) . . . . ?
W3 O8 W4 O25 -10.8(12) . . . . ?
W3 O8 W4 O11 85(2) . . . . ?
W3 O8 W4 O10 149.1(13) . . . . ?
W3 O8 W4 O18 73.5(12) . . . . ?
W5 O11 W4 O9 -174.8(9) . . . . ?
W5 O11 W4 O25 84.1(8) . . . . ?
W5 O11 W4 O8 -13(2) . . . . ?
W5 O11 W4 O10 -76.9(9) . . . . ?
W5 O11 W4 O18 -0.6(7) . . . . ?
P2 O10 W4 O9 123(2) . . . . ?
P2 O10 W4 O25 -46(3) . . . . ?
P2 O10 W4 O8 -137(2) . . . . ?
P2 O10 W4 O11 25.6(19) . . . . ?
P2 O10 W4 O18 -48.6(19) . . . . ?
Si1 O18 W4 O9 178(4) . . . . ?
W5 O18 W4 O9 34(5) . . . . ?
Si1 O18 W4 O25 54.4(11) . . . . ?
W5 O18 W4 O25 -89.7(6) . . . . ?
Si1 O18 W4 O8 -39.5(11) . . . . ?
W5 O18 W4 O8 176.4(6) . . . . ?
Si1 O18 W4 O11 144.5(12) . . . . ?
W5 O18 W4 O11 0.5(6) . . . . ?
Si1 O18 W4 O10 -126.7(13) . . . . ?
W5 O18 W4 O10 89.3(8) . . . . ?
W10 O26 W5 O13 -136.8(12) . . . . ?
W10 O26 W5 O11 124.6(10) . . . . ?
W10 O26 W5 O14 -35.7(11) . . . . ?
W10 O26 W5 O12 27(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O18 47.8(11) . . . . ?
W4 O11 W5 O13 172.8(9) . . . . ?
W4 O11 W5 O26 -88.3(8) . . . . ?
W4 O11 W5 O14 13(2) . . . . ?
W4 O11 W5 O12 79.8(8) . . . . ?
W4 O11 W5 O18 0.6(8) . . . . ?
W6 O14 W5 O13 113.4(17) . . . . ?
W6 O14 W5 O26 15.8(16) . . . . ?
W6 O14 W5 O11 -87(3) . . . . ?
W6 O14 W5 O12 -153.6(17) . . . . ?
W6 O14 W5 O18 -74.9(17) . . . . ?
P2 O12 W5 O13 -131.1(15) . . . . ?
P2 O12 W5 O26 65(3) . . . . ?
P2 O12 W5 O11 -33.8(13) . . . . ?
```

```
P2 O12 W5 O14 127.7(14) . . . . ?
P2 O12 W5 O18 43.7(13) . . . . ?
Si1 O18 W5 O13 165(5) . . . . ?
W4 O18 W5 O13 -55(5) . . . . ?
Si1 O18 W5 O26 -44.3(12) . . . . ?
W4 O18 W5 O26 96.1(6) . . . . ?
Si1 O18 W5 O11 -140.8(13) . . . . ?
W4 O18 W5 O11 -0.5(6) . . . . ?
Si1 O18 W5 O14 43.3(13) . . . . ?
W4 O18 W5 O14 -176.4(7) . . . . ?
Si1 O18 W5 O12 131.4(13) . . . . ?
W4 O18 W5 O12 -88.2(6) . . . . ?
W1 O16 W6 O15 137(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O14 -122(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O28 33(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O27 -40(3) . . . . ?
W1 O16 W6 O19 -41(2) . . . . ?
W5 O14 W6 O15 -136.0(16) . . . . ?
W5 O14 W6 O16 121.4(17) . . . . ?
W5 O14 W6 O28 33(3) . . . . ?
W5 O14 W6 O27 -33.2(17) . . . . ?
W5 O14 W6 O19 42.1(16) . . . . ?
W7 O28 W6 O15 -179.5(10) . . . . ?
W7 O28 W6 O16 -77.4(11) . . . . ?
W7 O28 W6 O14 12(3) . . . . ?
W7 O28 W6 O27 78.1(11) . . . . ?
W7 O28 W6 O19 2.3(9) . . . . ?
W10 O27 W6 O15 -178.5(10) . . . . ?
W10 O27 W6 O16 -1(3) . . . . ?
W10 O27 W6 O14 82.3(12) . . . . ?
W10 O27 W6 O28 -75.1(11) . . . . ?
W10 O27 W6 O19 -0.4(10) . . . . ?
Si1 O19 W6 O15 177(100) . . . . ?
W7 O19 W6 O15 -44(16) . . . . ?
W10 O19 W6 O15 47(16) . . . . ?
Si1 O19 W6 O16 -49.7(14) . . . . ?
W7 O19 W6 O16 89.5(9) . . . . ?
W10 O19 W6 O16 180.0(9) . . . . ?
Si1 O19 W6 O14 43.2(14) . . . . ?
W7 O19 W6 O14 -177.6(8) . . . . ?
W10 O19 W6 O14 -87.1(7) . . . . ?
Si1 O19 W6 O28 -140.9(15) . . . . ?
W7 O19 W6 O28 -1.7(7) . . . . ?
W10 O19 W6 O28 88.8(7) . . . . ?
Si1 O19 W6 O27 130.6(15) . . . . ?
W7 O19 W6 O27 -90.2(7) . . . . ?
W10 O19 W6 O27 0.3(7) . . . . ?
W10 O36 W7 O29 160.6(9) . . . . ?
W10 O36 W7 O30 -93.7(11) . . . . ?
W10 O36 W7 O28 64.8(10) . . . . ?
W10 O36 W7 O21 5(2) . . . . ?
W10 O36 W7 O19 -11.1(9) . . . . ?
W8 O30 W7 O29 -162(5) . . . . ?
W8 O30 W7 O36 96(5) . . . . ?
W8 O30 W7 O28 0(7) . . . . ?
W8 O30 W7 O21 -60(5) . . . . ?
W8 O30 W7 O19 21(5) . . . . ?
W6 O28 W7 O29 -177.9(10) . . . . ?
W6 O28 W7 O36 -76.7(11) . . . . ?
W6 O28 W7 O30 20(3) . . . . ?
W6 O28 W7 O21 81.9(10) . . . . ?
W6 O28 W7 O19 -2.4(10) . . . . ?
W1 O21 W7 O29 -159.7(13) . . . . ?
W1 O21 W7 O36 -5(2) . . . . ?
W1 O21 W7 O30 94.8(14) . . . . ?
W1 O21 W7 O28 -66.2(13) . . . . ?
```

```
W1 O21 W7 O19 11.6(13) . . . . ?
Si1 O19 W7 O29 168(4) . . . . ?
W6 O19 W7 O29 31(5) . . . . ?
W10 O19 W7 O29 -57(5) . . . . ?
Si1 O19 W7 O36 -127.8(15) . . . . ?
W6 O19 W7 O36 95.3(7) . . . . ?
W10 O19 W7 O36 7.6(6) . . . . ?
Si1 O19 W7 O30 -33.5(15) . . . . ?
W6 O19 W7 O30 -170.4(9) . . . . ?
W10 O19 W7 O30 101.9(8) . . . . ?
Si1 O19 W7 O28 138.5(15) . . . . ?
W6 O19 W7 O28 1.7(7) . . . . ?
W10 O19 W7 O28 -86.1(7) . . . . ?
Si1 O19 W7 O21 59.0(13) . . . . ?
W6 O19 W7 O21 -77.8(6) . . . . ?
W10 O19 W7 O21 -165.5(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O31 161(5) . . . . ?
W7 O30 W8 O32 -96(5) . . . . ?
W7 O30 W8 O23 0(7) . . . . ?
W7 O30 W8 O22 61(5) . . . . ?
W7 O30 W8 O20 -22(5) . . . . ?
W9 O32 W8 O31 -173.6(8) . . . . ?
W9 O32 W8 O30 87.4(10) . . . . ?
W9 O32 W8 O23 -70.1(9) . . . . ?
W9 O32 W8 O22 6(2) . . . . ?
W9 O32 W8 O20 4.0(7) . . . . ?
W3 O23 W8 O31 -178.9(7) . . . . ?
W3 O23 W8 O30 -19(2) . . . . ?
W3 O23 W8 O32 79.1(8) . . . . ?
W3 O23 W8 O22 -78.2(7) . . . . ?
W3 O23 W8 O20 4.8(6) . . . . ?
W2 O22 W8 O31 142.5(10) . . . . ?
W2 O22 W8 O30 -121.3(12) . . . . ?
W2 O22 W8 O32 -37(2) . . . . ?
W2 O22 W8 O23 39.1(10) . . . . ?
W2 O22 W8 O20 -35.2(10) . . . . ?
Si1 O20 W8 O31 162(7) . . . . ?
W3 O20 W8 O31 -63(8) . . . . ?
W9 O20 W8 O31 29(8) . . . . ?
Si1 O20 W8 O30 32.2(11) . . . . ?
W3 O20 W8 O30 167.7(8) . . . . ?
W9 O20 W8 O30 -100.0(8) . . . . ?
Si1 O20 W8 O32 129.2(10) . . . . ?
W3 O20 W8 O32 -95.3(6) . . . . ?
W9 O20 W8 O32 -3.0(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O23 -138.9(10) . . . . ?
W3 O20 W8 O23 -3.5(5) . . . . ?
W9 O20 W8 O23 88.9(5) . . . . ?
Si1 O20 W8 O22 -50.1(9) . . . . ?
W3 O20 W8 O22 85.4(5) . . . . ?
W9 O20 W8 O22 177.7(5) . . . . ?
W10 O34 W9 O33 -148(3) . . . . ?
W10 O34 W9 O24 19(5) . . . . ?
W10 O34 W9 O32 110(3) . . . . ?
W10 O34 W9 O25 -47(3) . . . . ?
W10 O34 W9 O20 38(3) . . . . ?
W3 O24 W9 O33 -178.9(12) . . . . ?
W3 O24 W9 O34 14(3) . . . . ?
W3 O24 W9 O32 -78.3(13) . . . . ?
W3 O24 W9 O25 80.6(13) . . . . ?
W3 O24 W9 O20 -5.2(11) . . . . ?
W8 O32 W9 O33 173.8(8) . . . . ?
W8 O32 W9 O34 -87.1(9) . . . . ?
W8 O32 W9 O24 70.6(11) . . . . ?
W8 O32 W9 O25 1(2) . . . . ?
W8 O32 W9 O20 -4.0(7) . . . . ?
```

```
W4 O25 W9 O33 -148.1(10) . . . . ?
W4 O25 W9 O34 114.4(10) . . . . ?
W4 O25 W9 O24 -45.3(12) . . . . ?
W4 O25 W9 O32 25(2) . . . . ?
W4 O25 W9 O20 29.5(9) . . . . ?
Si1 O20 W9 O33 -151(4) . . . . ?
W8 O20 W9 O33 -16(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O33 76(5) . . . . ?
Si1 O20 W9 O34 -36.3(9) . . . . ?
W8 O20 W9 O34 98.6(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O34 -168.8(6) . . . . ?
Si1 O20 W9 O24 136.3(11) . . . . ?
W8 O20 W9 O24 -88.7(8) . . . . ?
W3 O20 W9 O24 3.8(8) . . . . ?
Si1 O20 W9 O32 -132.0(10) . . . . ?
W8 O20 W9 O32 2.9(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O32 95.5(6) . . . . ?
Si1 O20 W9 O25 49.9(8) . . . . ?
W8 O20 W9 O25 -175.2(5) . . . . ?
W3 O20 W9 O25 -82.6(5) . . . . ?
W6 O27 W10 O35 172.5(11) . . . . ?
W6 O27 W10 O36 71.4(11) . . . . ?
W6 O27 W10 O34 -27(3) . . . . ?
W6 O27 W10 O26 -87.2(10) . . . . ?
W6 O27 W10 O19 0.4(10) . . . . ?
W7 O36 W10 O35 -162.5(9) . . . . ?
W7 O36 W10 O27 -65.0(11) . . . . ?
W7 O36 W10 O34 91.0(10) . . . . ?
W7 O36 W10 O26 -1(2) . . . . ?
W7 O36 W10 O19 10.8(8) . . . . ?
W9 O34 W10 O35 150(3) . . . . ?
W9 O34 W10 O27 -9(5) . . . . ?
W9 O34 W10 O36 -108(3) . . . . ?
W9 O34 W10 O26 48(3) . . . . ?
W9 O34 W10 O19 -37(3) . . . . ?
W5 O26 W10 O35 158.9(10) . . . . ?
W5 O26 W10 O27 64.6(11) . . . . ?
W5 O26 W10 O36 -2(2) . . . . ?
W5 O26 W10 O34 -94.6(10) . . . . ?
W5 O26 W10 O19 -13.8(10) . . . . ?
Si1 O19 W10 O35 174(4) . . . . ?
W7 O19 W10 O35 35(5) . . . . ?
W6 O19 W10 O35 -55(4) . . . . ?
Si1 O19 W10 O27 -131.5(14) . . . . ?
W7 O19 W10 O27 89.9(8) . . . . ?
W6 O19 W10 O27 -0.3(7) . . . . ?
Si1 O19 W10 O36 130.9(13) . . . . ?
W7 O19 W10 O36 -7.7(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O36 -97.8(7) . . . . ?
Si1 O19 W10 O34 37.3(12) . . . . ?
W7 O19 W10 O34 -101.3(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O34 168.6(7) . . . . ?
Si1 O19 W10 O26 -53.8(12) . . . . ?
W7 O19 W10 O26 167.6(6) . . . . ?
W6 O19 W10 O26 77.4(5) . . . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.996
_diffrn_reflns_theta_full              89.65
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.996
_refine_diff_density_max    1.835
_refine_diff_density_min   -1.825
_refine_diff_density_rms    0.263
```